

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 539.3

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2022.02.009

ВЛИЯНИЕ КОЛИЧЕСТВА АТОМОВ МЕТАЛЛА НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИТА НИКЕЛЬ/СКОМКАННЫЙ ГРАФЕН

Лилия Ришатовна Сафина^{1†}, Карина Александровна Крылова², Юлия Айдаровна Баимова³

^{1,2,3} Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, ул. Степана Халтурина, 39, 450001, Уфа, Россия

² Уфимский государственный нефтяной технический университет, ул. Космонавтов, 1, 450062, Уфа, Россия

³ Башкирский государственный университет, ул. З. Валиди, 32, 450076, Уфа, Россия

¹ saflia@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-6682-3278>

² bukreevakarina@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-6109-6454>

³ julia.a.baimova@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-5953-1186>

Аннотация. Методом молекулярной динамики изучено влияние соотношения атомов металла и углерода на механические свойства композита никель/графен. Рассмотрены четыре структуры с разным числом атомов никеля от 1344 до 4992. Предшественником композита является скомканный графен, поры которого заполнены наночастицами никеля разного размера. Для получения композита используют выдержку при комнатной температуре с последующим гидростатическим сжатием при 1000 К. Показано, что полученный композит имеет хорошие прочностные характеристики и высокую пластичность для любого рассмотренного количества атомов никеля в структуре. Однако с увеличением числа атомов никеля в системе прочность композита снижается. Следовательно, для получения композита с улучшенными механическими свойствами желательно использовать наночастицы меньших размеров, чтобы они могли равномерно распределяться внутри пор скомканного графена, способствуя возникновению новых химических связей между отдельными элементами композита.

Ключевые слова: графен, наночастицы никеля, композит графен/никель, молекулярная динамика, механические свойства.

Благодарности: Работа Сафиной Л.Р. и Баимовой Ю.А. поддержана грантом РФФИ (№ 20-72-10112). Работа Крыловой К.А. поддержана госзаданием ИПСМ РАН.

Для цитирования: Сафина Л.Р., Крылова К.А., Баимова Ю.А. Влияние количества атомов металла на механические свойства композита никель/скомканный графен // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2022. Т. 19, № 2. С. 213–220. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2022.02.009.

Original article

EFFECT OF THE PROPORTION OF METAL ATOMS ON THE MECHANICAL PROPERTIES OF THE NICKEL/CRUMPLED GRAPHENE COMPOSITE

Liliya R. Safina^{1†}, Karina A. Krylova², Julia A. Baimova³

^{1,2,3} Institute for Metals Superplasticity Problems of Russian Academy of Sciences, Khalturina Str., 39, Ufa, 450001, Russia

² Ufa State Petroleum Technological University, Kosmonavtov Str., 1, Ufa, 450062, Russia

³ Bashkir State University, Vally Str., 32, Ufa, 450076, Russia

¹ saflia@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-6682-3278>

² bukreevakarina@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-6109-6454>

³ julia.a.baimova@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-5953-1186>

Abstract. The effect of the ratio of metal and carbon atoms on the mechanical properties of the nickel/graphene composite is studied by molecular dynamics simulation. Four structures with different proportion of nickel atoms from 1344 to 4992 are considered. The precursor of the composite is crumpled graphene, with the pores filled with

nickel nanoparticles of different sizes. To obtain a composite, exposure at room temperature is used, followed by hydrostatic compression at 1000 K. It is shown that the resulting composite has good strength characteristics and high plasticity for any considered number of nickel atoms. However, with an increase in the number of nickel atoms in the system, the strength of the composite decreases. Therefore, to obtain a composite with improved mechanical properties, it is desirable to use small nanoparticles so that they can be evenly distributed inside the pores of crumpled graphene, facilitating the appearance of new chemical bonds between the individual elements of the composite.

Keywords: graphene, nickel nanoparticles, graphene-nickel composite, molecular dynamics, mechanical properties.

Acknowledgements: The work of LRS and JAB was supported by the grant of Russian Science Foundation (No. 20-72-10112). Work of KAK was supported by the State Assignment of IMSP RAS.

For citation: Safina, L. R., Krylova, K. A. & Baimova, J. A. (2022). Effect of the proportion of metal atoms on the mechanical properties of the nickel/crumpled graphene composite. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 2(19), 213–220. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2022.02.009.

Введение

К настоящему времени проведено множество исследований, посвященных нанокompозитам металл/углерод, полученным путем комбинации металлической матрицы и углеродного наполнителя, например, графена или углеродных нанотрубок [1, 2]. Показано, что такие материалы обладают малым весом, высокой жесткостью и уникальными механическими свойствами, что играет важную роль в различных отраслях промышленности [3-6], поскольку такие материалы могут сочетать в себе механические свойства графена [7, 8] с пластичностью металлической матрицы. Среди параметров, которые могут влиять на механическое поведение, структуру и свойства, можно назвать тип наполнителя или матрицы, количественное содержание компонентов, наличие дефектов и т.д. Например, в работе [9] показано, что прочность нанокompозитов металл/графен зависит от размера зерна металла и объемной концентрации графена.

Хорошо изучены также слоистые композиты металл/углерод. Установлено, что уменьшение толщины слоя металла приводит к упрочнению слоистых композитов графен/металл [10]. Наличие слоев графена определяет механизмы деформации таких композитов. В работе [11] показано, что покрытие на основе композита Ni/графен обладает отличными трибологическими свойствами за счет добавления графена, образующего смазочную пленку, что снижает коэффициент трения и повышает износостойкость. Кроме того, электроосаждение композитного покрытия Ni/оксид графена на низкоуглеродистой стали является эффективным антикоррозионным покрытием [12]. Композит Ni/графен, синтезированный электроосаждением на поверхность никелевой матрицы,

показал значительное увеличение механических свойств итогового материала [13]. Выбор наночастиц Ni в качестве наполнителя для скомканного графена вполне очевиден, поскольку никель/графеновые структуры рассматриваются как перспективные материалы и их взаимодействие хорошо изучено [14].

Растущий интерес к металлическим нанокompозитам на основе графена [15, 16] требует лучшего понимания механизмов упрочнения таких материалов. Однако экспериментальные исследования требуют больших усилий в виде использования специального оборудования или проведения дорогостоящих и трудоемких экспериментов. С этой точки зрения молекулярная динамика может быть эффективно использована для изучения различных структурных изменений и механических свойств, особенно для наноструктурированных материалов [17-22].

В данной работе методом молекулярной динамики исследуется влияние количества атомов металла на механические свойства композита никель/скомканный графен. Одним из перспективных методов получения композитов металл/графен является отжиг с последующим гидростатическим сжатием при повышенных температурах [23-25]. Для получения композита используются свернутые чешуйки графена, заполненные наночастицами никеля разного размера, в условиях высокотемпературного гидростатического сжатия.

Детали моделирования

Исходная структура состоит из системы свернутых чешуек графена (каждая чешуйка содержала $N_C = 252$ атома углерода), заполненных наночастицами Ni разного размера Ni₂₁, Ni₄₇, Ni₆₆ и Ni₇₈. Размеры наночастиц подобраны таким образом, чтобы самая крупная нано-

частица практически полностью заполнила полость чешуйки графена. Графен с наночастицами Ni случайным образом вращают для получения трехмерного образца за счет непрерывных атомных смещений по осям x , y , z . Подробная методика создания исходной структуры скомканного графена с наночастицами Ni описана в работах [23-25]. Периодические граничные условия применяются во всех направлениях.

Далее для упрощения скомканный графен с размером наночастички Ni₂₁, будем называть Композитом I, с Ni₄₇ – Композитом II, с Ni₆₆ – Композитом III, а с Ni₇₈ – Композитом IV. Таблица 1 показывает общее количество атомов во всех композитах Ni/графен и соотношение между количеством атомов углерода и никеля в структуре (N_{Ni}/N_C). На рис.1а представлена начальная структура скомканного графена, заполненного наночастицами никеля, состоящими из 47 атомов.

Таблица 1. Количество атомов в композитах Ni/графен и соотношение между атомами углерода ($N_C = 252$) и Ni (N_{Ni})

Table 1. Number of atoms in Ni/graphene composite and the ratio between carbon ($N_C = 252$) and Ni atoms (N_{Ni})

Название	Полное количество атомов	N_{Ni}	N_{Ni}/N_C
Композит I	17472	1344	0,083
Композит II	19136	3008	0,186
Композит III	20352	4224	0,261
Композит IV	21120	4992	0,309

Далее, для приведения в равновесное состояние, структуру скомканного графена, заполненную наночастицами никеля, выдерживают при комнатной температуре (300 К) в течение 20 пс (рис.1б). Следующий этап заключается в устранении пор между соседними элементами и приведение всех исходных структур примерно к одному размеру с помощью гидростатического сжатия. Начальный размер структур после предварительного сжатия составляет примерно $61 \times 61 \times 61$ Å. Для визуальной оценки, чешуйки графена и атомы металла показаны отдельно для четырех характерных структур на рис.1в-е.

На рис.1в хорошо видно, что скомканный графен после первичной обработки состоит из вытянутых чешуек графена и, соответственно, металлические наночастицы меньшего размера выглядят плоскими. Жесткая чешуйка графена сжимает более мягкую наночастицу металла. Также важно отметить, что графен по отношению к никелю обладает высокой энергией адгезии и легко притягивает металлическую наночастицу. В работе [14] показано, что в процессе выдержки наночастицы Ni интенсивно контактирует с графеновой подложкой.

Структура с Ni₄₇ рассматривается как промежуточный случай (рис.1г). Видно, что в процессе выдержки отдельные элементы скомканного графена перемешались друг с другом и с наночастицами металла потеряв свою идеальную сферическую форму.

Структуры с наибольшим числом атомов углерода показаны на рис.1д,е. Следует отметить, что Ni₆₆ и Ni₇₈ практически полностью заполняют чешуйку графена, что затрудняет перемешивание и деформацию структур. Большие частицы никеля потеряли начальную сферическую форму, но не стали плоскими в отличие от наночастиц меньшего размера.

Далее для получения композита Ni/графен применяется гидростатическое сжатие ($\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \epsilon_{zz} = \epsilon$) при 1000 К со скоростью деформации $\dot{\epsilon} = 0,01$ пс⁻¹.

Все расчеты проводятся с помощью общедоступного программного пакета LAMMPS. Для описания взаимодействия между атомами углерода использовался межатомный потенциал AIREBO [26], а взаимодействие Ni-Ni и Ni-C описывалось простым парным межатомным потенциалом Морзе с параметрами для Ni-Ni и Ni-C, представленные в работах [27-29].

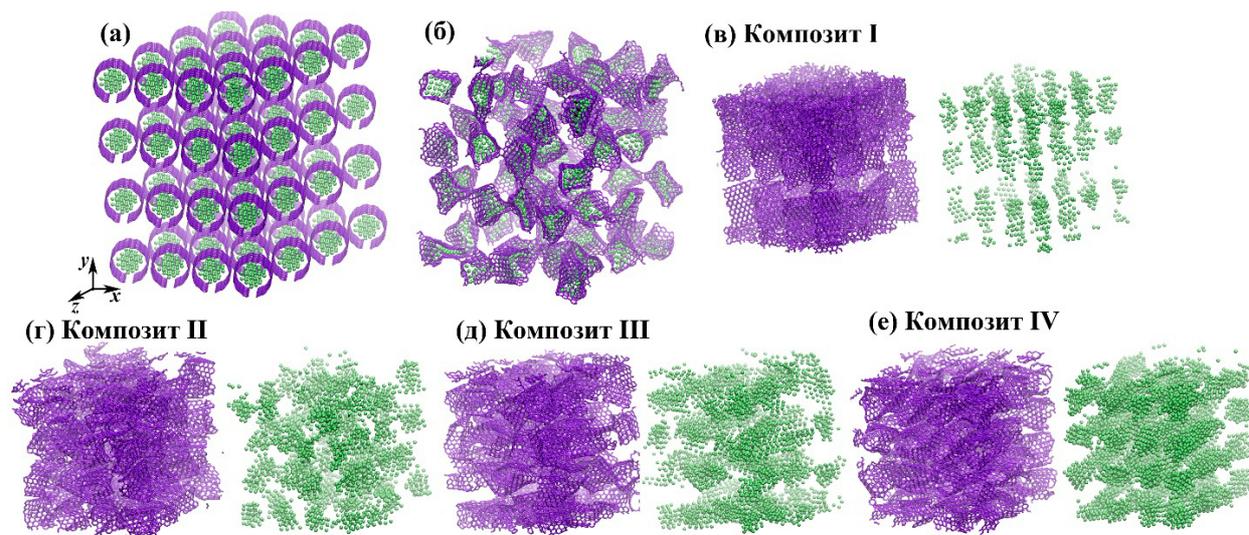


Рис.1. Скомканный графен, заполненный наночастицами Ni_{47} : (а) исходная структура; (б) структура после выдержки при 300 К. (в-е) Предварительно сжатая структура, в которой скомканный графен и металлические наночастицы показаны отдельно для Ni_{21} (в), Ni_{47} (г), Ni_{66} (д) и Ni_{78} (е). Атомы углерода показаны фиолетовым цветом, а атомы никеля – зеленым

Fig.1. Crumpled graphene filled with NP_{47} nanoparticles: (a) initial state; (b) after exposure at 300 K. (c-f) A pre-compressed state where crumpled graphene and metal nanoparticles are shown separately for Ni_{21} (c), Ni_{47} (d), Ni_{66} (e) and Ni_{78} (f). Carbon atoms are shown in purple and nickel atoms are shown in green

Результаты и их обсуждение

На рис.2а показаны кривые после одноосного растяжения для структур, полученных гидростатическим сжатием при 1000 К. Как видно, размер наночастиц Ni играет важную роль в прочности композита. С увеличением размера наночастиц Ni прочность композита снижается. Например, для Композита I наибольшее растягивающее напряжение равно 182 ГПа, а для Композита IV это значение в три раза ниже. Это можно объяснить тем, что более крупные наночастицы полностью заполняют полость чешуйки графена и, следовательно, деформировать структуру труднее.

В работе [14] показано, что температура плавления наночастиц Ni составляет 1360 К. В следствии этого, плавление крупных наночастиц никеля в процессе гидростатического сжатия при 1000 К не происходит, что приводит к неоднородному распределению металла внутри углеродной матрицы. В структурах с наночастицами малого размера металлическая частица Ni легче деформируется в процессе гидростатического сжатия, в связи с тем, что находится в предрасплавленном состоянии. Соответственно, появление новых химических связей, отвечающих за прочностные свойства композита, происходит быстрее. Несмотря на вышеска-

занное, важно подчеркнуть, что во всех четырех случаях можно получить композит, к тому же все структуры могут выдерживать большие деформации. Так при $\varepsilon = 5,0$ предел прочности еще не достигнут и структуры могут подвергаться дальнейшему растяжению.

Для более детального понимания процесса деформирования на рис.2б-д показаны одиночные элементы композитов – чешуйка графена, заполненная наночастицей Ni – в процессе одноосного растяжения на начальной и конечной стадиях деформирования. На начальном этапе видно, что все структуры находятся в скомканном состоянии. Следует отметить, что на данном рисунке образовавшиеся в процессе гидростатического сжатия химические связи между соседними единичными элементами структуры не отражены. Анализ ближайших соседей подтвердил, что большинство атомов углерода в этих условиях изменяют свою гибридизацию с sp^2 на sp^3 . С увеличением степени деформации чешуйки графена начинают разрушаться посредством формирования углеродных цепочек разной длины, что является известным «трикотажеподобным» механизмом разрушения графена [25]. Такие одноатомные углеродные цепочки образуются при больших растяжениях непосредственно перед разрушением [30, 31]. На рис.2б-д одиночные атомы углерода при-

надлежат соседним чешуйкам графена, которые не показаны. Благодаря прочности графена и наличию интенсивного контакта между графе-

ном и наночастицами Ni структуры могут выдерживать столь большие деформации.

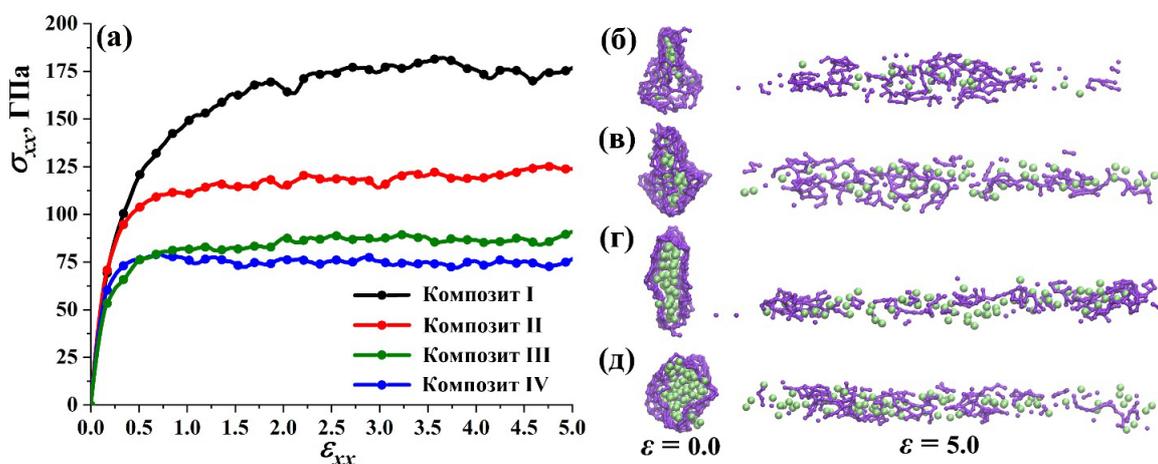


Рис.2. (а) Кривые напряжение-деформация в процессе одноосного растяжения для четырех типов композитов. (б-д) Единичный элемент композита – чешуйка графена, заполненная наночастицей никеля, в процессе одноосного растяжения для (б) Композита I, (в) Композит II, (г) Композит III и (д) Композит IV при $\epsilon = 0,0$ и $\epsilon = 5,0$. Цвета атомов такие же как на рис.1

Fig.2. (a) Stress-strain curves after uniaxial tension for four types of composites. (b-e) Snapshots of one structural unit – graphene flake filled with nickel nanoparticle under uniaxial tension for (a) Composite I, (b) Composite II, (c) Composite III and (d) Composite IV at $\epsilon = 0.0$ and $\epsilon = 5.0$. Colors as in Fig.1

На рис.3 представлена структура до и после одноосного растяжения до $\epsilon = 5,0$. Видно, что до растяжения Композит I выглядит более однородным из-за малого размера наночастицы: наночастицы Ni и чешуйки графена хорошо перемешаны. Для других композитов можно увидеть металлические наночастицы, которые не расплавились и поэтому неравномерно распределились по структуре. Однако при растяжении эти наночастицы взаимодействуют с графеном слабыми силами Ван-дер-Ваальса и более равномерно распределяются в структуре. Композиты после растяжения до $\epsilon = 5,0$ практически однородны. Несмотря на очень высокую приложенную деформацию, все композиты не имеют пор. Отсюда можно сделать вывод о возможности получения нового прочного и пластичного композитного материала на основе скомканного графена и наночастиц Ni.

Выводы

Таким образом, с помощью молекулярно-динамического моделирования изучено влияние соотношения атомов Ni и углерода на механические свойства композита Ni/графен. На основании полученных результатов установлено, что выдержка при комнатной температуре с

последующим гидростатическим сжатием при 1000 К может являться эффективным способом получения композита никель/графен. С помощью численных испытаний на одноосное растяжение установлено, что наибольшей прочностью обладает композит с наименьшим числом атомов никеля (Композит I), поскольку наночастицы внутри скомканного графена частично расплавляются в процессе гидростатического сжатия при 1000 К, что облегчает процесс перемешивания атомов никеля и углерода и способствует формированию большего числа прочных ковалентных связей.

Список литературы

1. Khisamov R., Nazarov K., Trinh P., Nazarov A., Phuong D., Mulyukov R. Field electron emission from a copper-based composite reinforced with carbon nanotubes // Lett. Mater. 2019. V. 9. P. 566–570.
2. Kurbanova E.D., Polukhin V.A., Galashev A.E. The comparative analysis of dependence on temperature of diffusion and strength characteristics of graphene reinforced Al, Ni and Ti films // Lett. Mater. 2016. V. 6. P. 271–275.
3. Neubauer E., Kitzmantel M., Hulman M., Angerer P. Potential and challenges of metal-

- matrix-composites reinforced with carbon nanofibers and carbon nanotubes // *Compos. Sci. Technol.* 2010. V. 70. P. 2228–2236.
4. Hu Z., Tong G., Lin D., Nian Q., Shao J., Hu Y., Saei M., Jin S., Chen G. J. Corrigendum to laser sintered graphene nickel nanocomposites // *J. Mater. Process. Technol.* 2016. V. 235. P. 105.
5. Shiozawa H., Briones-Leon A., Domanov O., Zechner G., Sato Y., Suenaga K., Saito T., Eisterer M., Weschke E., Lang W., Peterlik H., Pichler T. Nickel clusters embedded in carbon nanotubes as high performance magnets // *Sci. Rep.* 2015. V. 5. P. 15033.
6. Jiang J., He X., Du J., Pang X., Yang H., Wei Z. In-situ fabrication of graphene-nickel matrix composites // *Mater. Lett.* 2018. V. 220. P. 178–180.
7. Lee C., Wei X., Kysar J.W., Hone J. Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene // *Science*. 2008. V. 321. P. 385–388.
8. Cao K., Feng S., Han Y., Gao L., Ly T.H., Xu Z., Lu Y. Elastic straining of free-standing monolayer graphene // *Nat. Commun.* 2020. V. 11. P. 284.
9. Xia X., Du Z., Zhang J., Li J., Weng G.J. A hierarchical scheme from nano to macro scale for the strength and ductility of graphene/metal nanocomposites // *Int. J. Eng. Sci.* 2021. V. 162. P. 103476.
10. Rezaei R. Tensile mechanical characteristics and deformation mechanism of metal-graphene nanolayered composites. // *Comp. Mater. Sci.* 2018. V. 151. P. 181–188.
11. Xiang L., Shen Q., Zhang Y., Bai W., Nie C. One-step electrodeposited ni-graphene composite coating with excellent tribological properties // *Surf. Coat. Technol.* 2019. V. 373. P. 38–46.
12. Kamil M., Kim M., Ko Y. Direct electro-co-deposition of ni-reduced graphene oxide composite coating for anti-corrosion application // *Mater. Lett.* 2020. V. 273. P. 127911.
13. Ren Z., Meng N., Shehzad K., Xu Y., Qu S., Yu B., Luo J.K. Mechanical properties of nickel-graphene composites synthesized by electrochemical deposition // *Nanotechnology*. 2015. V. 26. P. 065706.
14. Safina L.R., Baimova J.A., Mulyukov R.R. Nickel nanoparticles inside carbon nanostructures: atomistic simulation // *Mech. Adv. Mater. Mod. Process.* 2019. V. 5. P. 2.
15. Khan M., Tahir M.N., Adil S.F., Khan H.U., Siddiqui M.R.H., Al-warthan A.A., Tremel W. Graphene based metal and metal oxide nanocomposites: synthesis, properties and their applications // *J. Mater. Chem. A*. 2015. V. 3. P. 18753–18808.
16. Feng S., Guo Q., Li Z., Fan G., Li Z., Xiong D.-B., Su Y., Tan Z., Zhang J., Zhang D. Strengthening and toughening mechanisms in graphene-al nanolaminated composite micro-pillars // *Acta Mater.* 2017. V. 125. P. 98–108.
17. Baimova J.A., Liu B., Dmitriev S.V., Zhou K. Mechanical properties of crumpled graphene under hydrostatic and uniaxial compression // *J. Phys. D Appl. Phys.* 2015. V. 48, P. 095302.
18. Baimova J.A., Liu B., Dmitriev S.V., Srikanth N., Zhou K. Mechanical properties of bulk carbon nanostructures: effect of loading and temperature // *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2014. V. 16. P. 19505.
19. Katin K.P., Prudkovskiy V.S., Maslov M.M. Molecular dynamics simulation of nickel-coated graphene bending // *Micro Nano Lett.* 2018. V. 13. P. 160–164.
20. Katin K.P., Maslov M.M. Thermal stability of carbon [n,5] prismanes (n = 2–4): a molecular dynamics study // *Mol. Simulat.* 2018. V. 44. P. 703–707.
21. Savin A.V., Mazo M.A. Molecular dynamics simulation of two-sided chemical modification of carbon nanoribbons on a solid substrate // *Dokl. Phys. Chem.* 2017. V. 473. P. 37–40.
22. Savin A.V., Korznikova E.A., Dmitriev S.V. Low frequency vibrations of carbon nanorolls // *Lett. Mater.* 2016. V. 6. P. 77–81.
23. Safina L.R., Baimova J.A. Molecular dynamics simulation of fabrication of Ni-graphene composite: temperature effect // *Micro Nano Lett.* 2020. V. 15. P. 176–180.
24. Safina L.R., Murzaev R.T., Krylova K.A. Molecular dynamics simulation of crumpled graphene filled with Ni nanoparticles // *IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng.* 2021. V. 1008. P. 012054.
25. Krylova K.A., Safina L.R., Murzaev R.T., Baimova J.A., Mulyukov R.R. Effect of nanoparticle size on the mechanical strength of Ni-graphene composites // *Materials*. 2021. V. 14. P. 3087.
26. Stuart S.J., Tutein A.B., Harrison J.A. A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions // *J. Chem. Phys.* 2000. V. 112. P. 6472–6486.
27. Girifalco L.A., Weizer V.G. Application of the Morse potential function to cubic metals // *Phys. Rev.* 1959. V. 114. P. 687–690.

28. Katin K.P., Prudkovskiy V.S., Maslov M.M. Molecular dynamics simulation of nickel-coated graphene bending // *Micro Nano Lett.* 2018. V. 13. P. 160–164.

29. Galashev A.Y., Katin K.P., Maslov M.M. Morse parameters for the interaction of metals with graphene and silicone // *Phys. Lett. A.* 2019. V. 383. P. 252–258.

30. Jhon Y.I., Zhu S.-E., Ahn J.-H., Jhon M.S. The mechanical responses of tilted and non-tilted grain boundaries in graphene // *Carbon.* 2012. V. 50. P. 3708–3716.

31. Sousa J.D., Aguiar A., Girão E., Fonseca A.F., Filho A.S., Galvão D. Computational study of elastic, structural stability and dynamics properties of penta-graphene membrane // *Chem. Phys.* 2021. V. 542. P. 111052.

32. Shuang F., Dai Z., Aifantis K.E. Strengthening in metal/graphene composites: Capturing the transition from interface to precipitate hardening // *ACS Appl. Mater. Inter.* 2021. V. 13. P. 26610–26620.

Информация об авторах

Л. Р. Сафина – исполняющий обязанности младшего научного сотрудника Института проблем сверхпластичности металлов РАН.

К. А. Крылова – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Института проблем сверхпластичности металлов РАН.

Ю. А. Баимова – доктор физико-математических наук, профессор РАН, заведующая лабораторией Института проблем сверхпластичности металлов РАН.

References

1. Khisamov, R., Nazarov, K., Trinh, P., Nazarov, A., Phuong, D. & Mulyukov, R. (2019). Field electron emission from a copper-based composite reinforced with carbon nanotubes. *Lett. Mater.*, 9, 566–570.

2. Kurbanova, E. D., Polukhin, V. A. & Galashev, A. E. (2016). The comparative analysis of dependence on temperature of diffusion and strength characteristics of graphene reinforced Al, Ni and Ti films. *Lett. Mater.*, 6, 271–275.

3. Neubauer, E., Kitzmantel, M., Hulman, M. & Angerer, P. (2010). Potential and challenges of metal-matrix-composites reinforced with carbon

nanofibers and carbon nanotubes. *Compos. Sci. Technol.*, 70, 2228–2236.

4. Hu, Z., Tong, G., Lin, D., Nian, Q., Shao, J., Hu, Y., Saei, M., Jin, S. & Chen, G. J. (2016). Corrigendum to laser sintered graphene nickel nanocomposites. *J. Mater. Process. Technol.*, 235, 105.

5. Shiozawa, H., Briones-Leon, A., Domanov, O., Zechner, G., Sato, Y., Suenaga, K., Saito, T., Eisterer, M., Weschke, E., Lang, W., Peterlik, H. & Pichler, T. (2015). Nickel clusters embedded in carbon nanotubes as high performance magnets. *Sci. Rep.*, 5, 15033.

6. Jiang, J., He, X., Du, J., Pang, X., Yang, H. & Wei, Z. (2018). In-situ fabrication of graphene-nickel matrix composites. *Mater. Lett.*, 220, 178–180.

7. Lee, C., Wei, X., Kysar, J. W. & Hone, J. (2008). Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene. *Science*, 321, 385–388.

8. Cao, K., Feng, S., Han, Y., Gao, L., Ly, T. H., Xu, Z. & Lu, Y. (2020) Elastic straining of free-standing monolayer graphene. *Nat. Commun.*, 11, 284.

9. Xia, X., Du, Z., Zhang J., Li, J. & Weng, G. J. (2021). A hierarchical scheme from nano to macro scale for the strength and ductility of graphene/metal nanocomposites. *Int. J. Eng. Sci.*, 162, 103476.

10. Rezaei, R. (2018). Tensile mechanical characteristics and deformation mechanism of metal-graphene nanolayered composites. *Comp. Mater. Sci.*, 151, 181–188.

11. Xiang, L., Shen, Q., Zhang, Y., Bai, W. & Nie, C. One-step electrodeposited ni-graphene composite coating with excellent tribological properties. (2019). *Surf. Coat. Technol.*, 373, 38–46.

12. Kamil, M., Kim, M. & Ko, Y. (2020). Direct electro-co-deposition of ni-reduced graphene oxide composite coating for anti-corrosion application. *Mater. Lett.*, 273, 127911.

13. Ren, Z., Meng, N., Shehzad, K., Xu, Y., Qu, S., Yu, B. & Luo, J. K. (2015). Mechanical properties of nickel-graphene composites synthesized by electrochemical deposition. *Nanotechnology*, 26, 065706.

14. Safina, L. R., Baimova, J. A. & Mulyukov, R. R. (2019). Nickel nanoparticles inside carbon nanostructures: atomistic simulation. *Mech. Adv. Mater. Mod. Process.*, 5, 2.

15. Khan, M., Tahir, M. N., Adil, S. F., Khan, H. U., Siddiqui, M. R. H., Al-warthan, A. A. &

- Tremel, W. (2015). Graphene based metal and metal oxide nanocomposites: synthesis, properties and their applications. *J. Mater. Chem. A*, 3, 18753-18808.
16. Feng, S., Guo, Q., Li, Z., Fan, G., Li, Z., Xiong, D.-B., Su, Y., Tan, Z., Zhang, J. & Zhang, D. (2017). Strengthening and toughening mechanisms in graphene-al nanolaminated composite micro-pillars. *Acta Mater.*, 125, 98–108.
17. Baimova, J. A., Liu, B., Dmitriev, S. V. & Zhou, K. (2015). Mechanical properties of crumpled graphene under hydrostatic and uniaxial compression. *J. Phys. D Appl. Phys.*, 48, 095302.
18. Baimova, J. A., Liu, B., Dmitriev S. V., Srikanth, N. & Zhou, K. (2014). Mechanical properties of bulk carbon nanostructures: effect of loading and temperature. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 16, 19505.
19. Katin, K. P., Prudkovskiy, V. S. & Maslov, M. M. (2018.) Molecular dynamics simulation of nickel-coated graphene bending. *Micro Nano Lett.*, 13, 160–164.
20. Katin, K. P. & Maslov, M. M. (2018). Thermal stability of carbon [n,5] prismanes (n = 2–4): a molecular dynamics study. *Mol. Simulat.*, 2018, 44, 703–707.
21. Savin, A. V. & Mazo, M. A. (2017). Molecular dynamics simulation of two-sided chemical modification of carbon nanoribbons on a solid substrate. *Dokl. Phys. Chem.*, 473, 37–40.
22. Savin, A. V., Korznikova, E. A. & Dmitriev, S. V. (2016). Low frequency vibrations of carbon nanoscrolls. *Lett. Mater.*, 6, 77–81.
23. Safina, L. R. & Baimova, J. A. (2020). Molecular dynamics simulation of fabrication of Ni-graphene composite: temperature effect. *Micro Nano Lett.*, 15, 176–180.
24. Safina, L. R., Murzaev, R. T. & Krylova, K. A. (2021). Molecular dynamics simulation of crumpled graphene filled with ni nanoparticles. *IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng.*, 1008, 012054.
25. Krylova, K. A., Safina, L. R., Murzaev, R. T., Baimova, J. A. & Mulyukov, R. R. (2021). Effect of nanoparticle size on the mechanical strength of Ni-graphene composites. *Materials*, 14, 3087.
26. Stuart, S. J., Tutein, A. B. & Harrison, J. A. (2000). A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions. *J. Chem. Phys.*, 112, 6472–6486.
27. Girifalco, L. A. & Weizer, V. G. (1959). Application of the morse potential function to cubic metals. *Phys. Rev.*, 114, 687–690.
28. Katin, K. P., Prudkovskiy, V. S. & Maslov, M. M. (2018). Molecular dynamics simulation of nickel-coated graphene bending. *Micro Nano Lett.*, 13, 160–164.
29. Galashev, A. Y., Katin, K. P. & Maslov, M. M. (2019). Morse parameters for the interaction of metals with graphene and silicone. *Phys. Lett. A*, 383, 252–258.
30. Jhon, Y. I., Zhu, S.-E., Ahn, J.-H. & Jhon, M. S. (2012). The mechanical responses of tilted and non-tilted grain boundaries in graphene. *Carbon*, 50, 3708–3716.
31. Sousa, J. D., Aguiar, A., Girão, E., Fonseca, A. F., Filho, A. S. & Galvão, D. (2021). Computational study of elastic, structural stability and dynamics properties of penta-graphene membrane. *Chem. Phys.*, 542, 111052.
32. Shuang, F., Dai, Z. & Aifantis, K. E. (2021). Strengthening in metal/graphene composites: Capturing the transition from interface to precipitate hardening. *ACS Appl. Mater. Inter.*, 13, 26610–26620.

Information about the authors

L. R. Safina – Junior Researcher at the Institute for Metals Superplasticity Problems of the Russian Academy of Sciences.

K. A. Krylova – PhD in Physical and Mathematical Sciences, Senior Researcher at the Institute for Metals Superplasticity Problems of the Russian Academy of Sciences.

J. A. Baimova – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor of the Russian Academy of Sciences, Head of Laboratory at the Institute for Metals Superplasticity Problems of the Russian Academy of Sciences.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 12.04.2022; одобрена после рецензирования 22.04.2022; принята к публикации 28.04.2022.

The article was received by the editorial board on 12 Apr. 22; approved after reviewing on 22 Apr. 22; accepted for publication on 28 Apr. 22.